31.界面の運動と一般化されたランダム・ウォーク(パターン形成,運動と統計,研究会報告)

原, 啓明

まっている。この比が大きくなると一般に小さなmで一連のバンド内のモード数nに対応する振動に対して一挙に不安定になる。一例を図5に示す。

31. 界面の運動と一般化されたランダム・ウォーク

東北大・工　原　　啓　明

“界面”は二元合金の核生成，スピノーダル分解[1)]に必らず，Kirkendal効果[2)]，焼結過程[3)]，種分化[4)]等と云った諸々の現象にも見られる共通の形状の一つである。この界面の運動はミクロな立場からは，系の自由エネルギーが分っているときはTDGL方程式を適用することで議論出来る。しかし，この記述は直接ある種の平均化された界面の運動が観測されたり，系によっては自由エネルギーで表わされない場合にはむしろ便利な方法とは云えない。

ここでは，ある種の平均化された界面の運動を確率過程として記述し，このプロセスを通じて逆に系の自由エネルギーの役目をするポテンシャル（作用量）を導出する方法について述べる。初めに界面の形状を表わす関数$\eta(x, t)$から導かれる$\phi(x, t)(=\eta_x(x, t))$を次の漸化式で表わした確率過程として考える。

$$\Phi(m, N)=\sum_{\alpha=\pm, 0} Q^{\alpha}_{N-1}(m \mid m-\alpha\cdot 1)\,\Phi(m-\alpha\cdot 1,\ N-1) \tag{1}$$

$\Phi(m, N)$は，原点から出発したウォーカーがNステップ後に位置mに到達する確率を表わし，$Q^{\alpha}_{N-1}(m \mid m-\alpha\cdot 1)$は$N-1$番目のステップで$m-\alpha\cdot 1$から$m$へとび移る確率を表わす。連続体近似（$x=ma$，$t=Nt_0$，$a^2/t_0=$一定，$a$，$t_0\to 0$）では，(1)はFokker-Planck(FP)方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x}(M^{(1)}\phi)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(M^{(2)}\phi) \tag{2}$$

となる。$M^{(i)}$（$i=1, 2$）はQ^{α}_Nを連続化して得られた$q^{\alpha}(x, t)$で求まる。[5)] ここでは$q^{\alpha}(x, t)$を次式で規定されたϕのプロセスとする。

$$q^{\pm}(x, t)=\frac{1}{2}\left[(1-q^0)\pm F\right] \tag{3}$$

$$q^0(x, t)=\frac{1}{2}\left[1+\frac{a}{2}\frac{\phi_x}{\phi}\right]$$

ただし，q^0 は止っている確率，F は系に働く“力”を特徴づける関数で $ab\phi(x,t)+(a/4)(\phi_x/\phi)-h(t)$ とする。このとき(2)は

$$\phi_t=-\left(\frac{2a^2b}{t_0}\phi-\frac{a}{t_0}h\right)\phi_x-\frac{a^3}{8t_0}\phi_{xxx} \tag{4}$$

となり，この特解は次の様になる。

$$\phi(x,\ t)=\frac{c}{2}\operatorname{sech}^2\left[\frac{\sqrt{c}}{2}(x-f(t,\ c))\right],\quad (c：\text{定数}) \tag{5}$$

$$f(t,\ c)=ct+\int h(t')\,\mathrm{d}t' \tag{6}$$

従って(1)又は(4)に対応する $\phi(x,\ t)$ の発展方程式は $f(t,\ c)$ 或いは $h(t)$ で系のダイナミックスを規定することで閉じた形になる。そして平均化された界面の運動によって f を与える。次に(4)で決まる軌道にゆらぎの効果を入れるため，空間に d 個の代表点をとり，その点における位置 $m_1,\ m_2,\cdots m_d$ によって決まるプロセスを，形式的な d 次元のGRWの漸化式で考える。[6)]

$$W(m_i\{m_j\},\ N)=\sum_{\alpha=\pm,0}\sum_{i=1}^{d}P^{\alpha}_{i,N-1}(m_i\{m_j\}\,|\,m_i-\alpha\cdot 1,\{m_j\})\,W(m_i-\alpha\cdot 1,\{m_j\},\ N-1),$$

$$(m_i,\{m_j\}=m_1,\ m_2,\cdots m_d) \tag{7}$$

(7)で，$\phi_i=m_i a,\ t=Nt_0$ と連続変数におきかえ，(2)に相当する連続体近似をとれば

$$\frac{\partial w(\phi_i,\{\phi_j\},\ t)}{\partial t}=-\sum_{i=1}^{d}\left(\frac{\partial}{\partial\phi_i}K_i^{(1)}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\phi_i^2}K_{ii}^{(2)}\right)w. \tag{8}$$

ただし $K_i^{(1)}(\{\phi\},\ t)=a(P_i^+-P_i^-)/t_0$，$K_{ii}^{(2)}(\{\phi\},\ t)=a^2(P_i^++P_i^-)/t_0$ である。更に(8)で $d\to\infty$ の極限移行を行うと

$$\frac{\partial w(\phi(\cdot),\ t)}{\partial t}=-\int\mathrm{d}x\,\frac{\delta}{\delta\phi}\left[K^{(1)}(\phi,\ t)+\frac{1}{2}K^{(2)}(\phi,\ t)\right]w \tag{9}$$

となる。この形式解は

$$w(\phi(\cdot),\ t)=\mathrm{e}^{-S[\phi]}, \tag{10}$$

$$S[\phi]=\int\mathrm{d}t\int\mathrm{d}x\,L(\phi,\ \phi_t,\ \phi_x) \tag{11}$$

である。L は $P^{\alpha}(\phi,\ t)$ で表わされていることから $P^{\alpha}(\phi,\ t)$ を適当に選べば $\delta S=0$ で決まる方程式を(4)の方程式と一致させることが出来る。この規定による L，即ち S はちょうどプロセスの“自由エネルギー”の役目をしている。

文　献

1) J. W. Cahn, Acta. Meta. **9** (1961) 795, J. Chem. Phys. **42** (1965) 93.

2) P. G. Shewmon, *Diffusion in Solid* (1963, McGraw-Hill).

3) G. C. Kuczynski, Trams. AIME. **185** (1949) 169.

4) L. E. Mettler, *Population Genetics and Evolution* (1969 Prentice-Hall).

5) H. Hara, Phys. Rev. **B20** (1979) 4062.

6) H. Hara,「確率過程，場の理論と統計力学」の研究会，数理研　1984．3月．

32.　有限体積比のオストワルド・ライプニングへの影響

九大・理　榎本　美久，川崎　恭治

東和大・教養　徳山　道夫

熱力学的不安定状態からの相分離，秩序化過程の問題は，非平衡統計力学の研究対象として近年，理論的，実験的研究が精力的に行なわれてきている。[1]

我々は特にオストワルド・ライプニングと呼ばれている二元合金の相分離現象を理論的に研究してきた。その結果，従来の理論にはみられなかった新しい効果（ソフト・コリジョン効果）がこの現象の最終段階において重要な役割を演じることがわかった。[2]

さて，この現象を最初に理論的に取扱ったのは，リフシッツとスリョウゾフ及びワーグナ（LSW）である。[3] 彼らはドロプレットとして析出するマイノリティ相の体積比 $q(t)=\frac{4\pi}{3v}\int dRR^3 \times f(R,\ t)$ がゼロの極限での最終段階において次のような結果を得ている。

1．半径 R のドロプレットのサイズ分布関数 $f(R,\ t)$ を解析的に求めた。分布関数は平均半径 $\overline{R}(t)$ でスケールされる。

2．$\overline{R}(t)$ は t の 1/3 乗則に従って増大する。

3．ドロプレット数密度 $n(t)=\int dRf(R,\ t)$ は，t に逆比例して減少する。

その後，有限体積比 $q(t)$ の影響を考慮してLSWの結果を補正しようとする試みが多くの人々によってなされてきた。[4]

最近，徳山・川崎はドロプレット間の空間相互作用を統計力学的に取扱った組織的な理論を提案した。それによると，ライプニングの最終段階でサイズ分布関数 $f(R,\ t)$ は，次式に従う